УДК 541.12.012.3

СИСТЕМНАЯ, СТРУКТУРНАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

Н.П. Горленко, Ю.С. Саркисов

Томский государственный архитектурно-строительный университет
E-mail: lls@tgasa.tomsk.su

Рассмотрены особенности взаимосвязи микро- и макроскопических свойств с позиции системной, структурной и информационной форм организации дисперсных систем. Предложена концепция реализации низкоэнергетических взаимодействий в рассматриваемых композициях, осуществляемых на полевом и вещественном уровнях.

Традиционные методы описания макроскопических свойств дисперсных систем сводятся к изучению отдельных характеристик ее компонентов, аддитивная составляющая которых и принимается, как правило, за конечный результат. В настоящее время накоплено достаточно много убедительных экспериментальных фактов, показывающих, что данный подход не является всеобъемлющим и не отражает реальность. Например, бромид калия и карбид титана имеют одинаковую кристаллическую структуру и параметры решетки, однако их макроскопические свойства резко различаются. Так, бромид калия не имеет цвета, легко растворяется в воде и плавится при температуре 1003 К, а карбид титана темного цвета, не растворяется в воде и даже в царской водке, и плавится при температуре более 3473 К [1].

Этот простой пример показывает, что знание микроструктуры недостаточно для прогнозирования конечных макроскопических свойств материала. Очевидно, что для оценки характеристики системы необходимо учитывать весь комплекс взаимодействий как физической, так и химической природы, включая отдельные ее компоненты и структурные образования типа кластеров или ассоциатов. Без учета этих взаимодействий невозможно объяснить целый ряд свойств создаваемых материалов, а значит, и научно обосновать возможные области их применения.

Целью настоящей работы является установление взаимосвязи микро- и макроскопических свойств дисперсных систем с позиции системной, структурной и информационной форм их организации.

Любую исследуемую систему можно представить, по-видимому, как совокупность взаимодействующих элементов, имеющих разную степень упорядоченности, различную энергию связи друг с другом и находящихся в соответствии с величиной их энтропии на разных уровнях организации ассоциативных образований, т.е. как иерархическую структуру. Если принять, что признаками системы [2] является способность: а) взаимодействовать с окружающей средой и другими системами как единое целое; б) состоять из подсистем более низких уровней и самой являться подсистемой для систем более высокого порядка, т.е. представлять собой иерархическую структуру; в) сохранять единую природу взаимодействий компонентов системы при изменении в известных пределах ее внутреннего состояния и внешних условий существования, – то появляется возможность дополнительной оценки состояния рассматриваемой системы как единого целого. Отличительной особенностью таких дисперсий является способность целого координировать и в известной мере контролировать поведение ее отдельных составляющих. Другими словами, под системной организацией следует понимать такое пространственное и временное упорядочение или разрушение системы, при котором изменение в ее любой части (дискретной составляющей) влияет на взаимоотношения других частей. По этой причине построение модели системной организации исследуемого объекта может быть достигнуто только при более полном учете всех возможных взаимодействий в системе.

Любая система, как пространственно-временная организация, подчиняется принципу Ле-Шателье: на изменение внешних условий она реагирует как единое целое таким образом, чтобы сохранить состояние равновесия. Так как одним из самых важных компонентов дисперсных систем является вода, рассмотрим на ее примере эволюцию комплекса возможных взаимодействий в системе типа "твердое тело-жидкость", в частности, "цемент-вода".

Исходя из основных положений различных теорий воды, можно отметить, что, несмотря на их многообразие, практически все они сводятся к двухструктурным моделям. Вода существует как в виде мономерных, (представляющих первый иерархический уровень системы), так и в виде ассоциированных молекул (второй уровень), соотношение которых зависит от условий окружающей среды. По мнению, например [3], количество полимерных молекул в ассоциате при комнатной температуре составляет $10^3…10^{11}$ единиц, а доля мономерной воды – порядка 10 %. Выделяя их как дискретные состояния (иерархические уровни), можно утверждать, что наиболее чувствительными к изменению внешних факторов являются мономерные молекулы воды, так как они обладают избыточной свободной энергией. При затворении цемента водой в контакт входят две фазы, одна из которых – цемент (в начальное время является кинетически наиболее инертной фазой), а вторая – жидкость затворения – динамически наиболее активная компонента. Между ассоциированными и мономерными молекулами воды поддерживается постоянное взаимодействие, отражающее стремление системы к сохранению нативной структуры жидкой фазы.

Неассоциированные молекулы воды в полном согласии с принципом Ле-Шателье способствуют устранению вмешательства постороннего компонента путем гидратационного связывания частиц цемента. Следс-

твием данного взаимодействия является уменьшение доли ассоциированных молекул и их количественного содержания в структуре растворителя как единой кинетической массы. Процесс продолжается до тех пор, пока не исчезнет второй, более высокий по степени организованности уровень дискретности – уровень ассоциированных молекул воды. При этом важно подчеркнуть, что в рассматриваемых физико-химических процессах происходит взаимодействие как отдельных молекул, так и кооперативных ансамблей среды, включающих сотни, тысячи и десятки тысяч структурных единиц. В результате возникает новая системная организация-дисперсия "цемент-вода", отличающаяся от первоначальной иным типом взаимодействия. Гидратные комплексы формируют следующий иерархический уровень, в котором молекулы воды находятся уже в более упорядоченном состоянии по отношению к исходной жидкости затворения [4]. По мере взаимодействия вяжущего с водой доля полимерной части молекул воды снижается, в результате чего создаются условия для перехода системы в коллоидное, либо наносостояние.

Нано- или коллоидная система по сравнению с жидкой водой – более организованная структура. При этом степень упорядоченности повышается, что приводит к принципиально новому типу (ориентационному по природе) взаимодействия диполей воды на границе раздела фаз. Как следствие, появляется вероятность объединения молекул воды в ассоциаты с характерным стремлением к восстановлению своей прежней полимерной структуры. Результатом этого процесса является образование структур более высокого порядка, в которых вода встраивается в кристаллическую решетку цементного камня с выделением ассоциативно-деассоциативных искаженных (приближающихся к первоначальным) структур чистой воды, что и наблюдается в реальных системах в виде эффекта водоотделения. Следует отметить, что на всех этапах взаимодействия таких структур, принадлежащих различным уровням организации, обмен веществ происходит по диффузионному механизму, что предполагает медленный этап их развития. Процесс эволюции заканчивается, когда новых уровней дискретности не образуется и межассоциативное взаимодействие существенно ослабляется. Этот этап отвечает жесткому связыванию молекул воды в структуре цементного камня. Последние совершают только колебательные движения вокруг положения равновесия, гармонизирующие со структурой твердой фазы. Однако, на самых ранних стадиях взаимодействия в системе "твердое тело-жидкость" внешние энергетические воздействия на систему могут существенным образом повлиять на характер рассматриваемых процессов.

На наш взгляд, величина энергии теплового движения (kT) может быть принята критерием разделения сильных (высокоэнергетических) и слабых (низкоэнергетических) воздействия на систему. Следует отметить, что низкоэнергетические воздействия, влияющие на процессы диффузионно-развивающихся промежуточных структур, в ряде случаев могут являться более эффективными по сравнению с высокоэнергетическими, где переход от одного дискретного состояния в другое осуществляется скачком. И хотя термин "информационное взаимодействие" наиболее приемлем к объектам живой природы, по-видимому, это понятие может быть также распространено и на объекты неживой природы [5]. В основе данного утверждения, прежде всего, лежат закономерности экспериментально наблюдаемых фактов, например, явление непропорциональной зависимости развития энергоемких процессов в системе от внесенного извне энергетического эквивалента.

Как уже отмечалось, роль низкоэнергетических взаимодействий нельзя недооценивать. Например, силы гравитационного притяжения являются определяющими в образовании Солнечной системы, а вклад этих сил во взаимодействие атомов и молекул пренебрежимо мал [6]. В равной мере это относится, например, и к влиянию магнитных полей на физико-химические системы. Рассмотрим вероятный механизм низкоэнергетических взаимодействий с позиций некоторых положений теории информации [5, 7–9]. Информация – одно из ключевых понятий интенсивно развивающейся в последнее время новой области химии – супрамолекулярной химии [10], которую можно рассматривать как химическую информатику (или молекулярную информатику). Предметом изучения этой молодой науки являются хранение, считывание и обработка на молекулярном уровне информации, записанной в виде структурных и временных параметров молекул и их ассоциатов.

Информация – это низкоэнергетическая субстанция, отражающая свойства системы либо на полевом (дистанционном), либо на вещественном (контактном) уровнях. Она способна распространяться в пространстве, воздействовать на другие системы, в особенности, с близкими параметрами и вызывать в них значительные изменения за счет перераспределения энергетических процессов.

Известно, что информационный сигнал [5], воспринимаемый системой количественно может быть оценен в соответствии с выражением: $J = \log_2 W_i$, где J – количество поступающей информации, W_i – количество дискретных и метастабильных состояний системы. Под метастабильным состоянием следует понимать такое квазиравновесное состояние отдельных (дискретных, наделенных одним и тем же комплексом свойств) структур, в котором развитие энергозависимых процессов равновероятно.

При дистанционном (полевом) взаимодействии запись информационного сигнала осуществляется путем изменения, например, фазы, частоты, амплитуды физического процесса, а при контактном – непосредственно на материальный носитель. Следует отметить, что наиболее эффективным является первый способ, так как скорость передачи информации веществом зависит от ряда факторов, например, от скорости диффузионного, конвективного, миграционного переноса компонентов системы, которая ограничена термодинамическими условиями существования системы. В частности, для воды скорость передачи информации, по-видимому, определяется скоростью обменных процессов между молекулами воды и их ассоциатами.

Информация для данной системы может быть значимой, не значимой и не воспринятой. Другими словами, информационный сигнал анализируется системой. Значимый информационный сигнал приводит к нарушению ее состояния равновесия. В свою очередь, смещения равновесия в рассматриваемых системах при низкоэнергетических взаимодействиях могут происходить только при условии наличия метастабильных состояний.

Еще одним из важных условий проявления информационного взаимодействия является кратность (повторяемость) и длительность электромагнитного импульса (при полевом воздействии), а также связанная с ним полоса частот. Согласно теории информации [8], ее поток J пропорционален числу импульсов и выражается формулой: $\Delta J = k = \frac{t}{\tau} \sim \frac{t\Delta\omega}{\pi}$, где k – количество импульсов, t – время поступления импульсов, τ – длительность импульса, $\Delta\omega$ – полоса частот.

Так как не вся информация является значимой, то информационный поток воспринимаемого сигнала с учетом шума можно выразить уравнением:

$$J = \frac{\Delta\omega}{2\pi}\ln(1+\frac{P_o}{P_m}),$$

где P_o – мощность значимого сигнала, P_m – мощность шума.

Если уровень шума превышает уровень значимого сигнала, то это не означает отсутствие эффективности восприятия информации. Это связано с тем, что значимый сигнал пропорционален числу повторений k, в то время как шум – $\sqrt{k}$. Отсюда вытекает важное следствие: накопление значимой информации можно повысить, увеличивая кратность воздействия, достаточной для запуска метастабильных изменений в системе и регулируемых ими энергозависимых реакций. В этом случае, очевидно, речь идет о степени усваиваемости информации.

Количество информации, получаемой системой, связано с ее термодинамическими функциями состояния выражением Бриллюэна [7], согласно которому разность энтропии и информации в замкнутой системе не убывает: $\Delta(S - J) > 0$, где S – значение энтропии. Уравнение показывает, что, воспринимая информацию, система может снизить свою физическую энтропию и, как следствие, совершить полезную работу.

Рассмотрим некоторые примеры информационного взаимодействия в системе на полевом и вещественном уровнях

Полевой уровень. Полевое воздействие эффективно проявляется, например, при обработке магнитным полем водосодержащих дисперсий, в частности, цементных систем. Существует достаточно много убедительных экспериментальных фактов, показывающих увеличение конечной прочности цементного камня и бетона, изменение кинетики твердения вяжущих после активации рассматриваемых систем низкоэнергетическими воздействиями электромагнитной природы [11, 12]. При этом энергия магнитного поля, используемая в этих технологиях, на несколько порядков ниже энергии теплового движения молекул. Однако, как показывают экспериментальные данные, кинетические кривые процессов структурообразования до и после магнитной активации существенно отличаются друг от друга, что позволяет утверждать о проявлении информационного (низкоэнергетического) фактора взаимодействия. Не вдаваясь в подробности механизма внешнего полевого воздействия, можно предположить, что наблюдаемые эффекты являются результатом изменения структурной организации вяжущей системы, в первую очередь, жидкой фазы. Это обусловлено, по-видимому, нарушением баланса ассоциативно-деассоциативных процессов в системе, т.е. изменением количественного соотношения подсистем высшего и низшего порядков (например, полимерных и мономерных составляющих компонентов жидкой фазы). Изменение кооперативных свойств системы приводит, в свою очередь, к изменению диффузионного массопереноса частиц, причем этот процесс носит автокаталитический характер. Наблюдаемый рост прочности вяжущего в условиях воздействия магнитным полем в ранние сроки твердения, когда процессы диффузии играют определяющую роль, доказывает справедливость данного утверждения. Кроме того, как оказалось, традиционные методы физико-химического анализа не позволяют выявить существенные отличия в структуре цементного камня при использовании низкоэнергетических воздействий. Следовательно, можно утверждать, что интенсификация процесса является результатом взаимодействия между отдельными составляющими ассоциативно-деассоциативных комплексов.

Вещественный уровень. Известно, что химические добавки, используемые, например, в строительном материаловедении, могут привести к суще-ственному изменению конечных свойств материала. При этом концентрация добавок преимущественно колеблется в пределах 0,001…5,0 масс. %. Даже присутствие посторонних примесей в твердом компоненте может привести к значительным эффектам. Например, использование оксидов кадмия или магния различной чистоты (“чда” и “осч”) в качестве исходного вяжущего приводит к формированию структур твердения, отличающихся по прочности на сжатие в десятки раз, хотя различия в содержании примесей в этих оксидах составляют сотые доли процента [12]. Наиболее богатый экспериментальный материал в этом отношении накоплен в других областях науки [13, 14]. Так, например, в медицине эффективно используют гомеопатические препараты. Во всех рассмотренных случаях количество вводимого вещества, как правило, не является функцией аддитивности свойств системы. Так как материально-энергетический баланс системы при введении малых доз практически не изменяется, то эти явления также целесообразно рассматривать с позиции системной организации.

Таким образом, учет особенностей системной, структурной и информационной форм организаций дисперсных систем позволяет значительно расширить возможности управления их свойствами с целью разработки ресурсо-энергосберегающих технологий получения материалов различного технического назначения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Реш Г., Гутман В. Структура и системная организация гомеопатических потенций // Вестник биофизической медицины. – 1994. – № 4. – С. 3–10.
2. Лаптев Б.И., Горленко Н.П., Сидоренко Г.Н., Дунаевский Г.Е. Информационные взаимодействия в неживой и живой природе. – Томск: Изд-во ТГУ, 2000. – 107 с.
3. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. – Л.: Наука, 1975. – 592 с.
4. Шварцев С.Л. Геологическая система "вода-порода" // Вестник Российской Академии наук. – 1977. – Т. 67. – № 6. – С. 518–525.
5. Мешков И.Н., Чириков Б.В. Электромагнитное поле. Ч. 1. – Новосибирск: Изд-во "Наука", 1987. – 272 с.
6. Бараш Ю.С. Силы Ван-дер-Ваальса. – М.: Наука, 1988. – 344 с.
7. Бриллюэн Л. Наука и теория информации. – М.: Изд-во физ.-мат. наук, 1959. – 168 с.
8. Яглом А.М., Яглом И.М. Вероятность и информация. – М.: Наука, 1973. – 211 с.
9. Пирс Дж. Символы, шумы. Закономерности передачи информации. – М.: Мир, 1967. – 146 с.
10. Лен Ж.–М. Супрамолекулярная химия. Концепция и перспективы. – Новосибирск: Изд-во "Наука", 1998 –334 с.
11. Мокроусов Г.М., Горленко Н.П. Физико-химические процессы в магнитном поле. – Томск: Изд-во ТГУ, 1989. – 128 с.
12. Саркисов Ю.С. Формирование структур твердения при получении строительных материалов на основе оксидов двухвалентных металлов. Автореф. дисс. … докт. техн. наук. – Томск, 1997. – 43 с.
13. Левицкий Е.Ф., Лаптев Б.И., Сидоренко Г.Н. Электромагнитные поля в курортологии и физиотерапии. – Томск: Изд-во ТГУ, 2000. – 128 с.
14. Карташов А.Г. Электромагнитные поля и экология. – Томск: Изд-во ТГУ, 2000. – 296 с.